

## ABSTRAK

SAPUTRI, V. H., 2020, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA JINTAN HITAM (*NIGELLA SATIVA L.*) TERHADAP TARGET TERAPI INFLAMASI, SKRIPSI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Jintan hitam (*Nigella sativa L.*) telah diketahui secara empiris memiliki khasiat sebagai anti inflamasi. Enzim yang mempengaruhi pada inflamasi adalah fosfolipase A<sub>2</sub> dan siklooksigenase (COX). Tujuan dari Penelitian ini ingin mengetahui interaksi antara senyawa yang terdapat jintan hitam berdasarkan skor konformasinya dan mengetahui interaksi farmakokinetika dari senyawa jintan hitam.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah docking molekuler dengan menggunakan perangkat lunak MarvinSkech, VegaZZ, 1.5.6, Autodock 4, PyMOL dan Discovery Studio. Hasil docking dinilai dari energi ikatan yang terbentuk antara senyawa uji dengan target terapi. Senyawa yang berhasil berikatan dengan protein target dilakukan uji profil farmakokinetik menggunakan ADMETLab untuk mengetahui profil ADME dari senyawa yang berpotensi sebagai anti inflamasi.

Pada hasil yang didapatkan, senyawa jintan hitam yang memiliki potensi sebagai obat anti inflamasi pada target protein COX-2, Fosfolipase A<sub>2</sub>, dan p38 MAPK, adalah thymoquinone dan nigelimine ,profil farmakokinetika pada senyawa thymoquinone memenuhi syarat dan aturan lipinski, tidak dapat berdifusi pada sawar otak, bukan protein substrat protein gp, dan banyak di metabolisme pada CYP450 sedangkan pada senyawa nigellimine hasil yang didapatkan kurang baik dan tidak memenuhi aturan lipinski, berdifusi pada syawar otak dan banyak bermetabolisme sebagai inhibitor CYP3A4.

---

Kata kunci : Inflamasi, jinten hitam, *Nigella sativa*, docking molekuler, COX-2 , fosfolipase A<sub>2</sub>, dan p38 MAPK.

## ABSTRACT

SAPUTRI, V. H., 2020, ANALYSIS OF THE CHEMICAL CONTENT OF BLACK CUMIN (NIGELLA SATIVA L.) TESTING ANALYSIS ON TARGETS OF INFLAMMATION THERAPY. PROPOSAL, UNIVERSITY OF SETIA BUDI

Black cumin (*Nigella sativa* L.) has been known empirically to have anti-inflammatory properties. Enzymes that affect of inflammatory the way phospholipids A2 and cyclooxygenase (COX). The purpose of this study was to determine the interaction between compounds that contain black cumin based on its conformation score and find the pharmacokinetic interaction of black cumin compounds..

The method used in this study was molecular docking by software of MarvinSkecth, VegaZZ, Autodock 4, PyMOL and Discovery Studio. The lower the bond energy value between the test compound and the target, the more stable the complex formed. Compounds that successfully bind to the target protein were tested for pharmacokinetic profiles using ADMETLab to determine the ADME profile of compounds which have the potential to be used as an anti-inflammatory.

Black cumin displays potential for use as an anti-inflammatory drug for targeting protein COX-2, Phospholipase A2, and p38 MAPK due to the presence of thymoquinone and nigelimine. The pharmacokinetic profiles of thymohydroquenon for the Lipinski rule, can not diffuse on the brain barrier, not the gp protein substrate, and most metabolized by CYP450, whereas nigellimine do not meet the Lipinski rule requirements, can not diffuse in the brain barrier, are not gp protein substrate, and generally include CYP3A4 inhibitors.

---

Keywords: Inflammation, black cumin, *Nigella sativa*, molecular docking, COX-2, phospholipase A2, and p38 MAP